

使用 Altura Poroshell 120 PFAS 色谱柱通过大体积直接进样法同时分析饮用水中的 C1-C18 PFAS

作者

Rongjie Fu, Weijun Yao 和
Zhicong Wang
安捷伦科技（上海）有限公司

Ivan Huang
安捷伦科技有限公司

摘要

目前，研究人员已在全球饮用水中普遍检出全氟烷基和多氟烷基化合物 (PFAS)。诸如三氟乙酸 (TFA)、全氟丙酸 (PFPrA) 及相关类似物等超短链 (USC) PFAS (C1-C3) 的分析颇具挑战性，原因在于其极性很强，在常规 C18 色谱柱上靠近溶剂前沿出峰，且易受液相色谱系统与溶剂背景污染的干扰。

本研究使用新型 Agilent Altura Poroshell 120 PFAS 色谱柱和专用 PFAS 延迟柱，开发了一种用于测定饮用水中 C1-C18 PFAS 的单次进样 LC/MS 方法。该方法通过对酸化水样进行大体积直接进样（多达 100 μ L），实现了对 USC PFAS 的良好保留和出色峰形，同时在检测 C1-C18 全系列 PFAS 时仍保持合理的运行时间。我们将其与常规 C18 色谱柱进行了性能对比，并展示了这种新型的 PFAS 色谱柱和延迟色谱柱设计如何有效降低系统背景干扰、简化工作流程，为常规饮用水分析提供可靠支持。

前言

PFAS 和超短链 PFAS

PFAS 是一大类氟化化学物质，广泛应用于不粘涂层、防水剂、工业流体等诸多产品中。由于它们具有很高的化学和热稳定性（因此被称为“永久化学品”），所以能在环境中持久存在，目前已在全球饮用水环境中被普遍检出。

早期的监管大多聚焦于少数长链 PFAS，例如 PFOA 和 PFOS。然而，随着产业转型与监测项目的增多，TFA、PFPrA 和小分子全氟磺酸盐等超短链 PFAS (C1-C3) 物质的出现更为频繁，在部分地表水与饮用水样品中甚至成为主要的 PFAS。这类化合物极性高，水溶性高，很难通过常规处理方法去除。同时，它们在传统反相色谱柱上的保留也较弱。从液相色谱分析的角度来看，这些特性使得 C1-C3 的系列 PFAS 分析变得难上加难。

USC PFAS 的监管趋势

全球监管正从“关注少数传统 PFAS”转向更广泛的 PFAS 类别管控，并逐步推进更低的报告限要求。示例包括：

- **美国：**已针对一系列优先控制的 PFAS 出台了国家饮用水法规，相关技术文件强调短链和 USC PFAS 是值得关注的新的风险点^[1,2]
- **欧盟：**欧盟委员会健康、环境和新兴风险科学委员会 (SCHEER) 在其 2025 年意见文件^[3,4] 中，审议了水框架指令下关于“PFAS 总量”的环境质量标准草案，确认将 TFA 纳入定义范围，并建议在现有 24 种 PFAS 的组别 EQS 值列表中增加 TFA。该意见还探讨了是否应为 TFA 设定单独标准，其中援引了 RIVM 提出的 2.2 µg/L 饮用水质量标准建议，并提及 TFA 被归类为生殖毒性 1B 类物质
- **其他地区：**更广泛的筛查研究表明，自来水、瓶装水和地表水中均含有 USC PFAS，促使地方政府出台指导意见并制定监测清单

即使目前尚未对 USC PFAS 进行明确监管，但实验室已被要求开展相关项目报告，或建立能够随监管升级灵活扩展的分析方法。这也催生了相关分析需求，导致业界亟需能够在单一工作流程中覆盖 C1 至 C18 全系列 PFAS 的液相色谱柱和分析方法。

分析挑战

从色谱分析的角度来看，USC PFAS 分析主要面临三大难题：C1-C3 PFAS 在典型 C18 色谱柱上出峰时间过早，通常在死体积位置或死体积附近位置洗脱。背景 PFAS 干扰，特别是 TFA 和 PFBA，可能来自溶剂、试剂和液相色谱系统组件。为简化流程，多数实验室希望跳过 SPE 而采用直接进样，但大体积水样进样容易导致早洗脱组分峰形不佳和溶剂效应。

为了解决这些问题，安捷伦专门开发了 Altura Poroshell 120 PFAS 色谱柱和新型 PFAS 延迟柱。本应用简报用方法开发实测数据，展示了这套新型色谱柱系统如何实现单次进样分析饮用水中 C1-C18 PFAS。

实验部分

仪器

使用配备高速泵的 Agilent 1290 Infinity II 液相色谱仪与 Agilent 6475 三重四极杆液质联用系统进行分析。该液相色谱仪采用配备 100 µL 进样定量环的 Multisampler 进样器。为了减少溶剂和液相色谱系统可能引入的 PFAS 污染和背景干扰，该系统已经过无 PFC LC 转换工具包升级。表 1 列出了液相色谱参数，表 2 列出了质谱参数。

表 1. 针对此方法优化的液相色谱参数

参数	设定值														
液相色谱仪	Agilent 1290 Infinity II, 配备无 PFAS 工具包 (部件号 5004-0006)														
延迟柱	Agilent Poroshell 120 PFAS, 4.6 × 30 mm, 2.7 μm (部件号 027403-007)														
分析柱	Agilent Poroshell 120 PFAS, 2.1 × 100 mm, 2.7 μm (部件号 227210-007)														
柱温	40 °C														
流动相	A) 5 mM 乙酸铵 + 0.05% 乙酸的水溶液 B) 5 mM 乙酸铵的甲醇溶液														
梯度	<table border="1"> <thead> <tr> <th>时间 (min)</th> <th>%B</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>0</td><td>10</td></tr> <tr><td>1</td><td>50</td></tr> <tr><td>14</td><td>100</td></tr> <tr><td>16</td><td>100</td></tr> <tr><td>16.1</td><td>10</td></tr> <tr><td>21</td><td>10</td></tr> </tbody> </table>	时间 (min)	%B	0	10	1	50	14	100	16	100	16.1	10	21	10
时间 (min)	%B														
0	10														
1	50														
14	100														
16	100														
16.1	10														
21	10														
进样量	100 μL														
流速	0.4 mL/min														

表 2. 针对此方法优化的质谱参数

参数	设定值
质谱仪	Agilent 6475 三重四极杆液质联用系统
电离模式	负离子模式 ESI
毛细管电压	2500 V
喷嘴电压	0 V
雾化器压力	20 psi
干燥气温度	230 °C
干燥气流速	6.0 L/min
鞘气温度	375 °C
鞘气流速	11.0 L/min
检测器增益因子	5

质谱采集方法

使用 Agilent MassHunter (数据采集软件 12.2 版) 进行动态 MRM (dMRM) 采集。采用 MassHunter 定量分析软件 (12.0 版) 完成所有数据处理。表 3 列出了本应用简报中采用 6475 三重四极杆液质联用系统分析的所有 PFAS 和同位素标准品的优化离子对和化合物参数。

表 3. 化合物采集参数 (下页续)

化合物名称	母离子 m/z	子离子 m/z	RT (min)	RT 窗口 (min)	极性
4:2FTS	327	307	9.23	1.36	负离子
4:2FTS	327	80	9.23	1.36	负离子
6:2FTS	427	407	11.07	1.34	负离子
6:2FTS	427	80	11.07	1.34	负离子
8:2FTS	527	507	12.44	1.21	负离子
8:2FTS	527	80	12.44	1.21	负离子
9CI-PF3ONS	530.9	350.9	11.89	1.31	负离子
9CI-PF3ONS	530.9	83	11.89	1.31	负离子
11CI-PF3OUdS	630.9	450.9	12.91	1.2	负离子
11CI-PF3OUdS	630.9	83	12.91	1.2	负离子
13C2-PFDoDA	615	570	13.45	1.2	负离子
13C2-PFDoDA	615	269	13.45	1.2	负离子
13C2-PFHxA	315	270	9.49	1.36	负离子
13C2-PFUnDA	565	519.9	13	1.2	负离子
13C3-PFPrA	166	120.9	5.83	1.38	负离子
13C4-PFBA	217	172	7.17	1.36	负离子
13C4-PFOA	417	372	11.19	1.33	负离子
13C4-PFOS	503	99	11.64	1.21	负离子
13C4-PFOS	503	80	11.64	1.21	负离子
13C-TFA	115	70	4.42	1.36	负离子
18O2-PFHxS	402.9	103	10.17	1.34	负离子
18O2-PFHxS	402.9	83.9	10.17	1.34	负离子
ADONA	377	251	10.37	1.21	负离子
ADONA	377	85	10.37	1.21	负离子
DFA	95	51.1	3.43	1.5	负离子
HFPO-DA	285	185	9.61	1.36	负离子
HFPO-DA	285	169	9.61	1.36	负离子
NFDHA	201	135	9.22	1.37	负离子
NFDHA	201	85	9.22	1.37	负离子
PFBA	213	169	7.17	1.38	负离子
PFBS	298.9	99	8.27	1.33	负离子
PFBS	298.9	80	8.27	1.33	负离子
PFDA	513	469	12.48	1.21	负离子
PFDA	513	269	12.48	1.21	负离子
PFDoA	613	569	13.45	1.2	负离子
PFDoA	613	269	13.45	1.2	负离子
PFEESA	314.9	135	8.66	1.36	负离子
PFEESA	314.9	69	8.66	1.36	负离子
PFEtS	199	79.8	5.89	1.32	负离子
PFHpA	363	319	10.41	1.21	负离子
PFHpA	363	169	10.41	1.21	负离子

化合物名称	母离子 <i>m/z</i>	子离子 <i>m/z</i>	RT (min)	RT 窗口 (min)	极性
PFHpS	448.9	99	10.96	1.21	负离子
PFHpS	448.9	80	10.96	1.21	负离子
PFHxA	313	269	9.5	1.39	负离子
PFHxA	313	119	9.5	1.39	负离子
PFHxDA	812.9	769	14.77	1.2	负离子
PFHxDA	812.9	269	14.77	1.2	负离子
PFHxS	398.9	99	10.17	1.26	负离子
PFHxS	398.9	80	10.17	1.26	负离子
PFMBA	279	235	8.72	1.36	负离子
PFMBA	279	85	8.72	1.36	负离子
PFMeS	149	79.9	4.68	1.35	负离子
PFMOAA	179	135	6.29	1.35	负离子
PFMOAA	179	84.8	6.29	1.35	负离子
PFMPA	229	85	7.59	1.33	负离子
PFNA	463	419	11.89	1.21	负离子
PFNA	463	169	11.89	1.21	负离子
PFOA	413	369	11.19	1.31	负离子
PFOA	413	169	11.19	1.31	负离子
PFODA	912.9	868.9	15.24	1.2	负离子
PFODA	912.9	169	15.24	1.2	负离子
PFOS	498.9	99	11.64	1.2	负离子
PFOS	498.9	80	11.64	1.2	负离子
PFPeA	263	219	8.43	1.38	负离子
PFPeS	348.9	99	9.29	1.34	负离子
PFPeS	348.9	80	9.29	1.34	负离子
PFPrA	163	118.9	5.82	1.35	负离子
PFPrS	248.9	79.8	7.13	1.2	负离子
PFTeDA	712.9	669	14.19	1.2	负离子
PFTeDA	712.9	169	14.19	1.2	负离子
PFTTrDA	663	619	13.84	1.31	负离子
PFTTrDA	663	169	13.84	1.31	负离子
PFUnA	563	319	13	1.2	负离子
PFUnA	563	269	13	1.2	负离子
TFA	113	68.9	4.42	1.2	负离子

样品前处理

本研究采用共溶剂化方法对水样进行样品前处理。取一组 50 mL 饮用水样品，经 0.2 μm 再生纤维素 (RC) 膜过滤。准确移取 10 mL 过滤水，加入适量冰乙酸并搅拌均匀，使水样中乙酸的最终浓度为 0.1%，静置平衡 5 分钟；准确移取 0.5 mL 上述酸化水样至聚丙烯样品瓶中，加入 10 μL 内标溶液（甲醇配制，浓度 5 μg/L），再加入 0.5 mL 甲醇，涡旋振荡 1 分钟混匀，保存留待后续 LC/MS 分析。在自来水样品中加入混标，使其浓度分别达到 20 ng/L 和 100 ng/L，由此配制回收率样品。

标样配制

稀释标样储备液，得到以下浓度的校准溶液：1000、500、200、100、50、20、10、5、2 和 1 ng/L。所有样品均在甲醇/水 (50:50) 混合溶液中配制，其中水溶液含 0.1% 乙酸。各样品中均加入 10 μL 内标溶液。该内标溶液由同位素标记的替代标准品溶于甲醇配制而成，浓度为 5 μg/L。

方法验证

对所建立的方法进行了线性、回收率和精密度验证。通过绘制峰面积比与浓度的校准曲线来评估线性。向自来水样品中加入已知浓度的所有分析物，评估整个方法的回收率和精密度。由于水样中 TFA 污染较高，本研究使用 ¹³C-TFA 替代 TFA 进行相关实验。

结果与讨论

USC PFAS 的保留时间和峰形

首先，我们使用一组早洗脱的 PFAS（包括 TFA、PFMeS、PFPrA、PFBA 和相关化合物）对比了 2.1 × 50 mm Agilent InfinityLab Altura Poroshell 120 PFAS 色

谱柱与两种常规 C18 色谱柱（Agilent ZORBAX Eclipse Plus C18 和 Agilent InfinityLab Poroshell 120 EC-C18）的性能。对比色谱图如图 1 所示。在常规 C18 色谱柱上，我们观察到 TFA 和最小分子磺酸盐 (PFMeS) 在死时间 (t_0) 附近洗脱，部分 C2-C4 分析物出现峰展宽或轻微峰变

形，且存在系统背景干扰，特别是对 TFA 和 PFBA。使用新型 PFAS 色谱柱之后，我们发现 C1-C3 PFAS 的保留明显增强，使其远离死体积和溶剂前沿，USC PFAS 整体峰形更尖锐、更对称，PFBA 与邻近背景之间的分离度更高，积分更加直观。

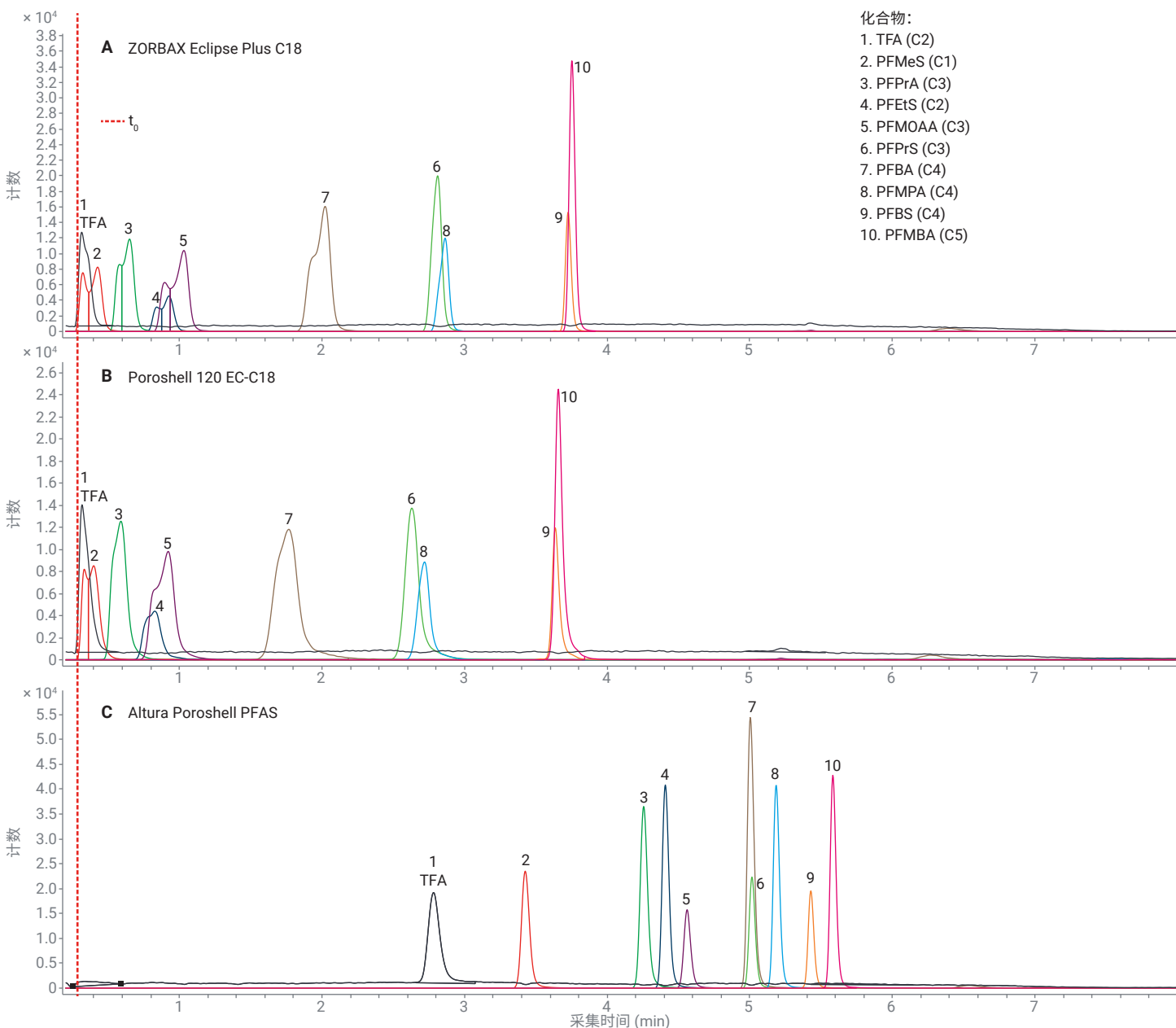


图 1. 常规 C18 色谱柱与 Agilent Altura Poroshell PFAS 色谱柱的色谱图比较。本次对比中使用的色谱柱规格为 2.1 × 50 mm

这表明新型色谱柱及其硬件系统针对早洗脱 PFAS 进行了优化，同时在柱效和背压方面仍然保持了现代 Poroshell 色谱柱的性能特点。

新型 PFAS 延迟柱的性能

系统引入的 PFAS（尤其是 TFA 和 PFBA）是 PFAS 分析工作流程中的已知问题。我们比较了使用延迟柱和不使用延迟柱的配置。对于 TFA，在不使用延迟柱时，强烈的系统背景峰会与目标分析物的保留时间窗口重叠。而新型延迟柱去除了系统引入的大部分 TFA 污染，为目标分析物提供了干净的基线（图 2）。

对于 PFBA，我们也观察到类似现象，新型延迟柱实现了样品 PFBA 与系统背景之间的理想分离，如图 3 所示。

总的来说，新型延迟柱提供了更干净的基线，使低浓度的 USC PFAS 峰更容易识别，尤其是在与新型分析柱结合使用时，效果尤为显著。

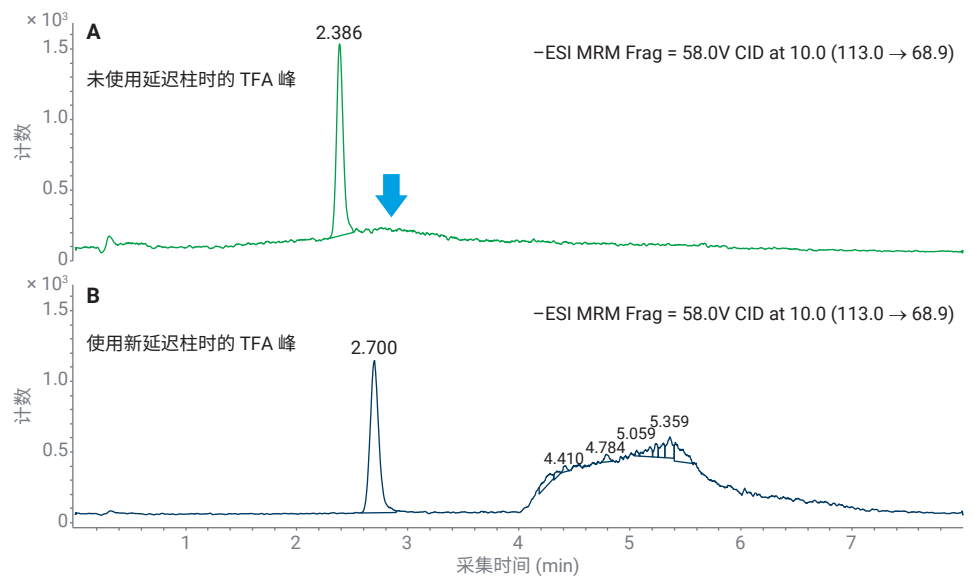


图 2. 使用和不使用新型 PFAS 延迟柱进行 TFA 色谱分析的结果

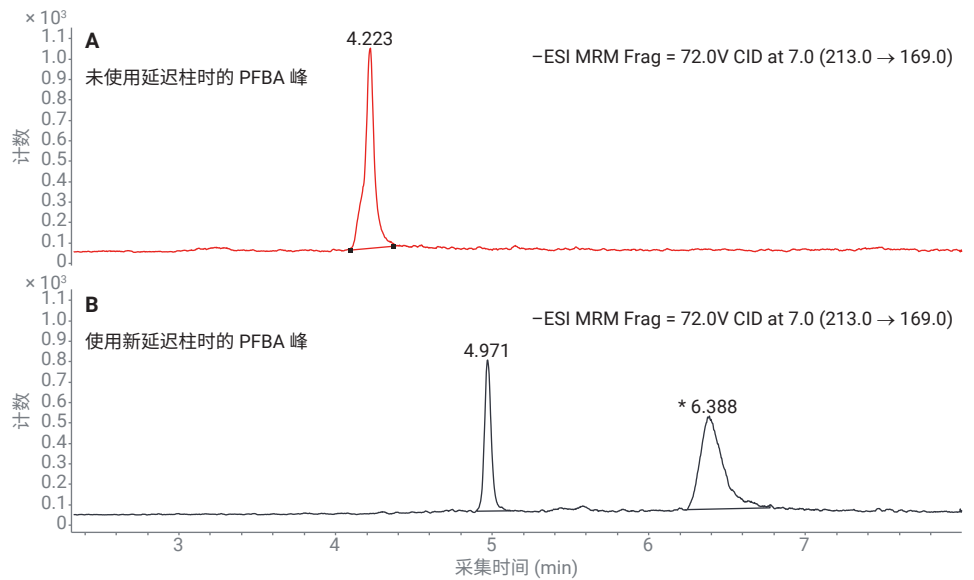


图 3. 使用和不使用新型 PFAS 延迟柱进行 PFBA 色谱分析的结果

乙酸对溶剂效应和大体积进样的影响

在方法开发过程中，我们对使用不含酸的水/甲醇 (50:50) 溶液配制的样品进行了大体积进样 (高达 100 μ L) 测试。在此条件下，USC PFAS (如 TFA 和 PFPrA) 出现明显的溶剂效应，表现为峰分裂和峰展宽 (见图 4A)，在进样体积较大时尤为显著。

通过在样品稀释液和标准品中加入 0.1% 的乙酸解决了这个问题。USC PFAS 的峰变窄且峰形对称 (见图 4B)。即使在 100 μ L 进样体积下，溶剂效应也基本消失。这种方法调整易于实施，且不会引起背压问题，无疑是推动大体积直接进样在常规实验室分析中成为可能的关键所在。

使用 100 mm 色谱柱实现 C1-C18 单次进样分析

随后，我们采用 2.1 \times 100 mm Altura Poroshell 120 PFAS 色谱柱，在 100 μ L 进样体积下评估了 C1-C18 单次进样的分析性能 (图 5)。

主要观察结果

使用 2.1 \times 100 mm Altura Poroshell 120 PFAS 色谱柱，我们成功在单次分析中实现 C1-C18 全覆盖：DFA、TFA 和其他 USC PFAS 获得有效保留，实现了明显分离，而长链 PFAS 在梯度洗脱后期出峰且分离度良好。USC 和长链 PFAS 的保留时

间在多次进样中均保持稳定，满足常规检测需求，且 100 mm 色谱柱在高含量水相条件下运行时，反压完全控制在标准 1290 Infinity II 系统的限值范围内。

对于那些希望通过大体积进样获得出色灵敏度而无需增加 SPE 步骤的实验室来说，这种配置无疑是理想之选。

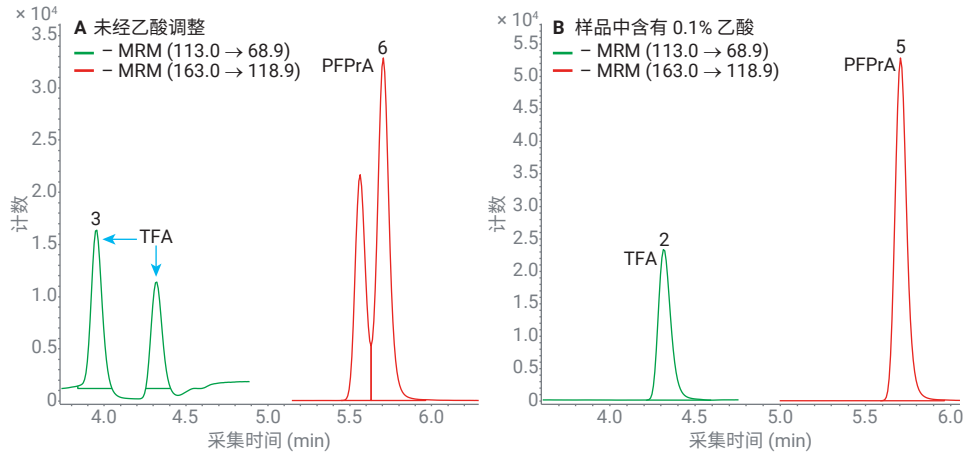


图 4. (A) TFA 和 PFPrA 的进样体积为 100 μ L，样品中不含乙酸；(B) TFA 和 PFPrA 的进样体积为 100 μ L，样品中含有 0.1% 乙酸

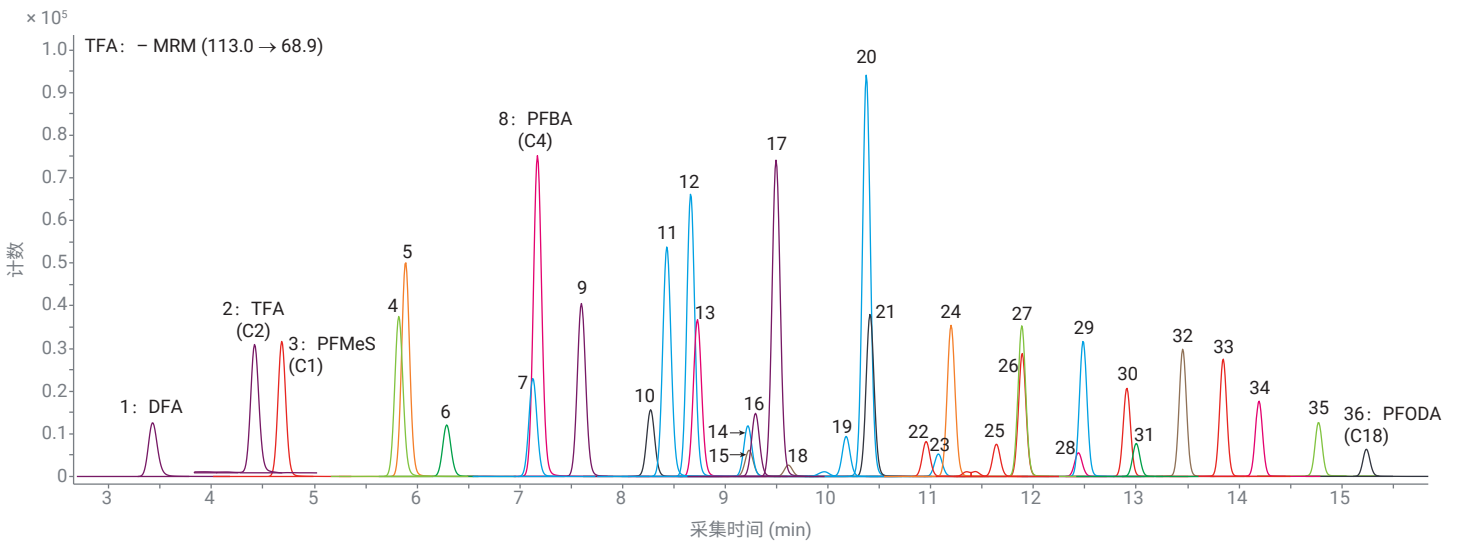


图 5. 色谱图中的化合物：1. DFA；2. TFA；3. PFMeS；4. PFPrA；5. PFETs；6. PFMOAA；7. PFPrS；8. PFBA；9. PFMPA；10. PFBS；11. PFPeA；12. PFEESA；13. PFMBa；14. NFDHA；15. 4:2 TFS；16. PFPeS；17. PFHxA；18. HFPO-DA；19. PFHxS；20. ADONA；21. PFHpA；22. PFHpS；23. 6:2FTS；24. PFOA；25. PFOS；26. 9Cl-PF3ONS；27. PFNA；28. 8:2FTS；29. PFDA；30. 11Cl-PF3OUdS；31. PFUnA；32. PFDoA；33. PFTrDA；34. PFTeDA；35. PFHxDA；36. PFODA

线性

使用 $1/x$ 加权的线性拟合生成校准曲线，准确度可接受范围为 70%–130%。在本研究中，所有分析物（除 PFODA 外，其偏差可能源于样品瓶非特异性吸附）均获得了出色的线性 ($R^2 > 0.995$)，其中每种化合物至少使用五个校准标样点。在后续研究中，对于长链 PFAS，可考虑使用 80% 甲醇浓度以获得良好的线性与回收率。结果列于表 4 中。少数几种在 50% 甲醇中溶解度极差的疏水性化合物（例如 PFODA 和 PFHxDA），低浓度时表现不佳，这与其物化性质相符，而非色谱柱相关。

表 4. 校准曲线结果

化合物	ISTD	线性范围 (ng/L)	R^2
DFA	^{13}C -TFA	1–1000	0.999
^{13}C -TFA*	–	1–1000	0.998
PFMeS	^{13}C -TFA	1–1000	0.999
PFPrA	$^{13}\text{C}_3$ -PFPrA	1–1000	0.999
PFEtS	$^{13}\text{C}_3$ -PFPrA	1–1000	0.999
PFMOAA	$^{13}\text{C}_3$ -PFPrA	1–1000	0.999
PFPrS	$^{13}\text{C}_4$ -PFBA	1–1000	0.998
PFBA**	$^{13}\text{C}_4$ -PFBA	10–1000	0.997
PFMPA	$^{13}\text{C}_4$ -PFBA	1–1000	0.999
PFBS	$^{13}\text{C}_4$ -PFBA	1–1000	0.999
PFPeA	$^{13}\text{C}_4$ -PFBA	1–1000	0.999
PFEESA	$^{13}\text{C}_4$ -PFBA	1–1000	0.999
PFMBA	$^{13}\text{C}_4$ -PFBA	1–1000	0.999
NFDHA	$^{13}\text{C}_2$ -PFHxA	1–1000	0.999
4:2FTS	$^{13}\text{C}_2$ -PFHxA	1–1000	0.999
PFPeS	$^{13}\text{C}_2$ -PFHxA	1–1000	0.999
PFHxA	$^{13}\text{C}_2$ -PFHxA	1–1000	0.999
HFPO-DA	$^{13}\text{C}_2$ -PFHxA	5–1000	0.997
PFHxS	$^{18}\text{O}_2$ -PFHxS	1–1000	0.999
ADONA	$^{18}\text{O}_2$ -PFHxS	1–1000	0.999
PFHpA	$^{18}\text{O}_2$ -PFHxS	2–1000	0.999
PFHpS	$^{18}\text{O}_2$ -PFHxS	1–1000	0.999
6:2FTS	$^{18}\text{O}_2$ -PFHxS	1–1000	0.999
PFOA	$^{13}\text{C}_4$ -PFOA	5–1000	0.998
PFOS	$^{13}\text{C}_4$ -PFOS	1–1000	0.999
9Cl-PF3ONS	$^{13}\text{C}_4$ -PFOS	1–1000	0.999
PFNA	$^{13}\text{C}_4$ -PFOA	10–1000	0.999
8:2FTS	$^{13}\text{C}_4$ -PFOA	1–1000	0.998
PFDA	$^{13}\text{C}_4$ -PFOA	10–1000	0.998
11Cl-PF3OUdS	$^{13}\text{C}_4$ -PFOA	2–1000	0.997
PFUnA	$^{13}\text{C}_2$ -PFUnDA	1–1000	0.999
PFDoA	$^{13}\text{C}_2$ -PFDoDA	1–1000	0.999
PFTTrDA	$^{13}\text{C}_2$ -PFDoDA	10–1000	0.997
PFTeDA	$^{13}\text{C}_2$ -PFDoDA	5–1000	0.999
PFHxDA***	$^{13}\text{C}_2$ -PFDoDA	50–1000	0.998
PFODA***	$^{13}\text{C}_2$ -PFDoDA	–	–

* TFA 可能会污染试剂水、甲醇和其他用于样品前处理的试剂，因此使用替代物质 ^{13}C -TFA 建立校准曲线

** 在样品前处理过程中，发现试剂水或其他材料中存在 PFBA 污染，干扰了低浓度含量的测定

*** 由于 PFODA 在低浓度下响应较差且不稳定（可能是由容器及样品瓶表面非特异性吸附导致），其线性数据未予报告。在 PFHxDA 中也观察到类似现象

回收率和精密度

向 5 mL 自来水样品中加入已知浓度的所有分析物，评估整个方法的回收率和精密度。将表 5 所列的全部分析物分别以 20 ng/L 和 100 ng/L 浓度加入六个自来水样品中。平均回收率和相对标准偏差 (RSD) 列于表 5 中。除 DFA 外，所有分析物的回收率均在 80%–120% 范围内。本应用简报中检测的所有分析物在自来水中的 RSD 均小于 10%。

在所有目标化合物中，DFA 的回收率较低。本研究考察了用作氯淬灭剂的乙酸铵和亚硫酸钠，但二者均未能改善 DFA 的回收率。DFA 回收率偏低可能是由于自来水中的基质效应，因此建议使用同位素标记的 DFA 内标来测定自来水中的 DFA。

表 5. 加入各种标准品的自来水样品的回收率和精密度

分析物	加入 20 ng/L 标准品的自来水		加入 100 ng/L 标准品的自来水	
	回收率 (%)	RSD (%)	回收率 (%)	RSD (%)
DFA	46%	3.2	46%	1.2
¹³ C-TFA*	86%	1.3	86%	0.6
PFMeS	88%	1.2	106%	0.5
PFPrA	94%	1.3	100%	0.7
PFEtS	94%	1.8	97%	0.5
PFMOAA	94%	1.5	101%	1.3
PFPrS	95%	1.9	96%	0.6
PFBA	74%	4.6	114%	1.0
PFMPA	96%	0.7	99%	0.3
PFBS	91%	2.3	93%	0.9
PFPeA	96%	1.2	96%	0.7
PFEESA	91%	0.9	93%	0.4
PFMBA	95%	1.4	96%	0.3
NFDHA	96%	3.7	99%	1.6
4:2FTS	103%	5.9	105%	2.9
PFPeS	94%	2.4	93%	1.5
PFHxA	96%	1.0	99%	0.7
HFPO-DA	109%	5.0	106%	4.2
PFHxS	101%	3.8	102%	0.9
ADONA	101%	2.7	104%	0.7
PFHpA	104%	2.5	103%	1.7
PFHpS	101%	4.5	100%	1.0
6:2FTS	108%	4.7	111%	2.3
PFOA	96%	1.7	97%	1.5
PFOS	99%	3.2	97%	0.7
9Cl-PF3ONS	93%	2.9	95%	1.6
PFNA	107%	2.4	104%	1.3
8:2FTS	97%	8.6	101%	4.1
PFDA	109%	2.3	103%	1.7
11Cl-PF3OUdS	86%	3.6	93%	1.2
PFUnA	98%	5.9	99%	3.5
PFDoA	93%	2.8	97%	1.0
PFTTrDA	94%	2.9	81%	2.7
PFTeDA	91%	4.8	94%	1.3
PFHxDA**	–	–	122%	6.2
PFODA**	–	–	–	–

* TFA 可能会污染试剂水、甲醇和其他用于样品前处理的试剂，因此使用替代物质 ¹³C-TFA 建立校准曲线

** 在样品前处理过程中，PFBA 也可能污染试剂水或其他材料，从而干扰低浓度含量的测定

*** 由于 PFODA 在低浓度下响应较差且不稳定（可能是由容器及样品瓶表面非特异性吸附导致），其线性数据未予报告。在 PFHxDA 中也观察到类似现象

实际水样分析

最后，我们将该方法应用于瓶装水、自来水 and 地表水等多种实际水样。在所有水样中均检出多种 PFAS，其中 USC PFAS 在总体 PFAS 谱图中贡献显著。结果列于表 6 中。

Altura Poroshell 120 PFAS 分析柱、新型 PFAS 延迟柱与酸化样品的大体积直接进样技术联用，无需任何样品预浓缩步骤，即可获得 USC 和长链 PFAS 良好分离的色谱图和可靠的积分结果。

表 6. 实际水样的成分分析结果

化合物名称	瓶装水 (ng/L)	地表水 #1 (ng/L)	地表水 #2 (ng/L)	自来水 (ng/L)
DFA	< 1.0	22.3	66.9	23.7
TFA	-	-	-	-
PFMeS	< 1.0	209.9	377.4	106.6
PFPrA	< 1.0	25.1	49.8	29.7
PFEtS	< 1.0	< 1.0	10.6	< 1.0
PFMOAA	< 1.0	11.8	28.9	11.1
PFPrS	< 1.0	< 1.0	< 1.0	< 1.0
PFBA	< 10.0	< 10.0	< 10.0	< 10.0
PFMPA	< 1.0	< 1.0	< 1.0	< 1.0
PFBS	< 1.0	12.0	18.7	4.1
PFPeA	< 1.0	2.7	< 1.0	< 1.0
PFMBA	< 1.0	< 1.0	< 1.0	< 1.0
PFEESA	< 1.0	< 1.0	1.1	< 1.0
NFDHA	< 1.0	< 1.0	< 1.0	< 1.0
4:2FTS	< 1.0	< 1.0	< 1.0	< 1.0
PFHxA	< 1.0	17.7	15.3	10.2
PFPeS	< 1.0	< 1.0	< 1.0	< 1.0
HFPO-DA	< 5.0	< 5.0	< 5.0	< 5.0
PFHxS	< 1.0	< 1.0	1.2	< 1.0
PFHpA	< 2.0	< 2.0	< 2.0	< 2.0
ADONA	< 1.0	< 1.0	< 1.0	< 1.0
6:2FTS	< 1.0	< 1.0	< 1.0	< 1.0
PFHpS	< 1.0	< 1.0	< 1.0	< 1.0
PFOA	< 5.0	10.8	22.5	< 5.0
PFNA	< 10.0	< 10.0	< 10.0	< 10.0
9Cl-PF3ONS	< 1.0	1.4	< 1.0	< 1.0
PFOS	< 1.0	< 1.0	< 1.0	< 1.0
8:2FTS	< 1.0	< 1.0	< 1.0	< 1.0
PFDA	< 10.0	< 10.0	< 10.0	< 10.0
11Cl-PF3OUdS	< 2.0	< 2.0	< 2.0	< 2.0
PFUnA	< 1.0	< 1.0	< 1.0	< 1.0
PFDoA	< 1.0	< 1.0	< 1.0	< 1.0
PFTTrDA	< 10.0	< 10.0	< 10.0	< 10.0
PFTeDA	< 5.0	< 5.0	< 5.0	< 5.0
PFHxDA	< 50.0	< 50.0	< 50.0	< 50.0
PFODA	-	-	-	-

结论

采用新型 Agilent Altura Poroshell 120 PFAS 色谱柱和 PFAS 延迟柱建立了一种简便的一次进样分析饮用水中的 C1-C18 PFAS 的 LC/MS/MS 方法，与标准 C18 色谱柱相比，本方法显著改善了 C1-C3 USC PFAS 的保留和峰形，同时延迟柱还可有效分离 TFA 和 PFBA 背景干扰峰与分析物，从而降低背景干扰。该方法支持高达 100 µL 的大体积直接进样，无严重的溶剂效应或峰变形，在整个分析范围内呈现出良好的线性、回收率和精密度，且运行时间和压力均与常规 LC/MS 配置兼容。随着法规和客户需求日益趋向更广泛的 PFAS 检测范围，以及对 USC PFAS 的高度关注，这种色谱柱配置为实验室提供了一种简易途径，可在单一方法中将检测能力从传统 PFAS 扩展到完整的 C1-C18 PFAS 范围。

参考文献

1. **PFAS National Primary Drinking Water Regulation.** (2024, April 26). Federal Register
2. D8421- 25: Standard Test Method for Determination of Per- and Polyfluoroalkyl Substances (PFAS) in Aqueous Matrices by Co-solvation followed by Liquid Chromatography Tandem Mass Spectrometry (LC/MS/MS). (n.d.). <https://store.astm.org/d8421-25.html>
3. EUR-LEX - 52024XC04910 - EN - EUR-LEX. (n.d.). <https://eur-lex.europa.eu/eli/C/2024/4910/oj/eng>
4. SCHEER (Scientific Committee on Health, Environmental and Emerging Risks). - Scientific Opinion on "Draft Environmental Quality Standards for PFAS Total under the Water Framework Directive". European Commission, 6 March 2025. Public Health
5. Zenobio, J. E.; Salawu, O. A.; Han, Z.; Adeleye, A. S. Adsorption of Per- and Polyfluoroalkyl Substances (PFAS) to Containers, *Journal of Hazardous Materials Advances* **2022**, 7, 100130. ISSN 2772-4166, <https://doi.org/10.1016/j.hazadv.2022.100130>

查找当地的安捷伦客户中心：

www.agilent.com/chem/contactus-cn

免费专线：

800-820-3278, 400-820-3278 (手机用户)

联系我们：

LSCA-China_800@agilent.com

在线询价：

www.agilent.com/chem/erfq-cn

www.agilent.com

DE-011781

本文中的信息、说明和指标如有变更，恕不另行通知。

© 安捷伦科技 (中国) 有限公司, 2026
2026 年 1 月 6 日, 中国出版
5994-8895ZHCN